

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H03454

研究課題名（和文）3次元電磁波動散乱問題に対する時間領域境界要素法の高速アルゴリズムの開発

研究課題名（英文）Development of a fast algorithm of time-domain boundary element method for 3D electromagnetic scattering problems

研究代表者

高橋 徹（Takahashi, Toru）

名古屋大学・工学研究科・准教授

研究者番号：90360578

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,900,000円

研究成果の概要（和文）：まず、3次元電磁波動散乱問題用（散乱体は完全導体と仮定）の時間領域境界要素法（TDBEM）に対する高速アルゴリズムを新たに提案し、数値実験によって、従来のアルゴリズムに従うTDBEMよりも有意に計算時間および必要記憶量の削減に成功した。次に、開発した高速TDBEMプログラムをメモリ分散計算環境（PCクラスター）用にOpenMPIとOpenMPを併用したハイブリッド並列化した。並列化効率が高々50%に留まっているものの、必要メモリの分散化においては成功したと言える。最後、表面電流密度に基づくTDBEMに適した形状微分の導出に成功し、勾配法に基づく形状最適化手法の開発を実現した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高速多重極法を端とする境界要素法の高速化に関する約30年に渡る研究領域において、難易度が高い時間領域電磁波動散乱問題に対して高速アルゴリズムの開発および並列実装を達成した点は学術的に価値が高い。同時に、対象を完全導体のみならず誘電体や金属に拡張するための基盤を形成した点も有意義である。本高速時間領域境界要素法の適用には課題を残したが、本研究が開発した時間領域境界要素法に基づく形状最適化手法そのものは普遍的な内容であり、自由空間（大気あるいは宇宙空間）における過渡的な電磁波動現象の解析・設計に対して有用なツールを産業・社会に広く提供するものである。

研究成果の概要（英文）：First, we proposed a new fast algorithm for the time-domain boundary element method (TDBEM) for three-dimensional electromagnetic wave scattering problems, assuming that a scatterer is a perfect conductor. We succeeded in significantly reducing the computation time and required amount of memory. Next, we parallelized the developed fast TDBEM program with both OpenMPI and OpenMP for a memory distributed computing environment (actually, a PC cluster). Although the parallelization efficiency remains at 50% at most, it can be said that it was successful in distributing the required memory. Finally, we succeeded in deriving a shape derivative suitable for the TDBEM based on the surface current density and then realized the gradient-based shape optimization method.

研究分野：計算科学

キーワード：電磁波動散乱問題 境界要素法 高速アルゴリズム 時間領域 形状最適化問題 形状微分

1. 研究開始当初の背景

現代社会において電波（無線）を利用した機器の重要性は増加しており、その設計・開発・分析を効率化するために数値シミュレーション（数値電磁気学）の果たす役割も増している。その中で、時間応答は物理的に理解し易く、かつ離散時間フーリエ変換を施せば周波数応答も得られるため、時間領域の解析は有用であり、その数値解法の高度化は重要である。

時間領域電磁場解析に対して今日標準的な数値解法は時間領域差分法（FDTD法）である。FDTD法は曲面や斜面のモデル化が不得意であり、無限空間（自由空間）の解析には近似が必須であるが、計算量と必要記憶量が低いために、その人気を不動のものにしている。一方、本研究が注目する時間領域境界要素法（TDBEM；電磁場解析ではモーメント法とも呼ぶ）は対照的である。歴史的には、TDBEMの短所である膨大な計算コストの問題を解決する結果としてFDTD法が誕生した。とは言え、電磁場解析において頻出の無限空間が犠牲となった点は、学術的に見れば大きな後退である。そのため、TDBEMの計算コストの低減は大きな課題となっている。

TDBEMの計算コストの問題は、一般の境界要素法（BEM）にも共通する。その解決の突破口となったのは、Greengardら [1] によって提案された高速多重極法（FMM）と呼ばれる分割統治型の高速アルゴリズムである [1]。とりわけ、周波数領域の波動問題に対する各種BEMはFMMによって加速され、それらFMMに基づく“高速BEM”はメジャーな商用CAEソフトに今日では統合されるまでになった。

他方、本研究が対象とする時間領域の波動問題（非定常波動問題）に対するFMMの構成は、時間軸を新たに加味する必要があるために難解である。そのため、これまでに構成を試みた研究は数例しか存在しない。その中の一つとして、本応募者は3次元スカラー波動方程式のTDBEMに対するFMMを開発した [2]。当高速TDBEMが有する計算量は、 N_s を境界要素数、 N_t を時間ステップ数とすると、 $O(N_s^{1.33} N_t)$ ないしは $O(N_s^{1.5} N_t)$ と理論的に見積もられる（境界要素が面状ないしは体状に分布していると仮定）。この計算量は、従来アルゴリズムに従うTDBEMが有する計算量 $O(N_s^2 N_t)$ と比較して本質的に高速である。

2. 研究の目的

上記の背景の下に、本研究の主目的を①3次元非定常電磁波動散乱問題に対する高速TDBEMの構成とした。続いて、更なる計算時間の短縮および大規模問題の実行を実現するために、②分散メモリ環境におけるプログラムの並列化を行うこととした。最後、応用上重要かつBEMと親和性が高い③形状最適化問題に取り組むこととした。

3. 研究の方法

前節で述べた三つの目的について、それぞれを以下のような方法によって研究を行う。

(1) 3次元非定常電磁波動散乱問題に対する高速TDBEMの構成

本高速TDBEMの根幹をなす高速アルゴリズムは、FMMを時間領域に拡張し、かつBEMの基礎式である境界積分方程式に現れる基本解の変数分離表現として「補間」を用いるタイプのFMMである。この種のFMMは補間型FMMと呼ばれる（以下、IFMMと略記する）。当IFMMは先行研究 [2] を踏襲したものであるが、定式化の詳細は目下の電磁波動散乱問題に強く依存する。

定式化のポイントとなるのは、**A** 時間安定的な積分方程式系を用いること、**B** 時間ステップ数を N_t とするとき、計算コストが $O(N_t^2)$ となることを避け、 $O(N_t)$ とすることである。特に、M2L計算（遠方からの影響を表す多重極モーメントを近傍点の局所展開係数へ変換する計算）をスカラー波動方程式と同様に構成することはできず、本Maxwell方程式に特化したアイデアを創出することが必要である。

(2) 分散メモリ環境におけるプログラムの並列化

理想的には、分散メモリ環境（本研究経費で調達したPCクラスター）内の全CPUの処理時間を均等化するよう当高速TDBEMの計算を各CPU上に分散することが必要があるが、それに伴い通信量は増大する可能性がある。したがって、計算量と通信量の均衡点を見出すことは最適化問題を解くことになる。そこで、遺伝的アルゴリズムを用いた最適化を検討する。

(3) 形状最適化

TDBEM を利用した 3 次元非定常電磁波動散乱問題に関する形状最適化の方針は、随伴変数法に基づき目的関数の勾配すなわち形状微分を用いることである。その形状微分は、本研究の場合 (= 自由空間に配置された完全導体を散乱体とする場合) よりも一般的な場合に対して Cagnol ら [3] によって既に誘導されていることが本研究課題を開始後に判明した。しかし、その形状微分を完全導体の場合に単純に書き下した表現は、BEM との親和性が低いことが判明し、この問題の解決を行うこととした。また、解くべき随伴問題に対する TDBEM の定式化は自明ではなく、電磁場の積分表現および積分方程式を随伴問題から根本的に誘導することによって行う。

4. 研究成果

(1) 3次元非定常電磁波動散乱問題に対する高速 TDBEM の構成

まず、本研究課題の核心である 3 次元非定常電磁波動散乱問題に対する高速 TDBEM の土台となる従来アルゴリズムに従う TDBEM の定式化について検討した。研究初年度 (2021 年度) は、研究の方法 (1) で述べた④については、定番である電場積分方程式 (EFIE) と磁場積分方程式 (MFIE) の線型結合である結合型積分方程式 (CFIE) を用いることとし、⑤については、本来の未知量である表面電流に時間微分することによって一致する Herz ベクトルを用いることとした。開発した TDBEM プログラムによって計算した数値解を半解析的に求めた理論解と比較したところ良く一致し、定式化の妥当性を検証した。

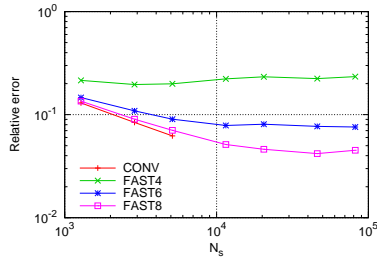
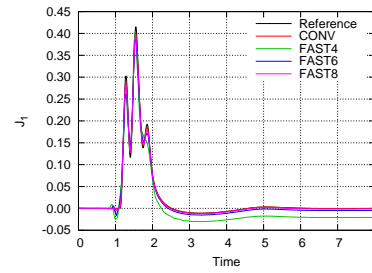
続いて、高速 TDBEM の開発に進んだ。高速化の定式化は研究代表者によるスカラー波動方程式に対する IFMM [2] を高次の時間基底に拡張することを起点とした。境界積分方程式が複雑である当電磁波動問題に先行して、スカラー波動方程式に対する拡張された IFMM の開発に成功した (「5. 主な発表論文等」の上から 6 件目の論文)。その IFMM を基として上記の CFIE に対する IFMM を構成することができた。ところが、高速化は近似の導入によるものであるため、上記した理論解との比較において高速 TDBEM の時間不安定性が比較的大規模な問題において顕在化した。

そこで、EFIE の時間微分を行うことによって、計算コストを $O(N_t)$ に保ちつつ、Herz ベクトルの代わりに本来の境界量である表面電流を直接扱うこととした。しかし、時間微分された EFIE は時間不安定であるため、何らかの MFIE との結合が必要との着想を得て、時間微分された EFIE に時間微分された MFIE と MFIE それ自体の両方を結合した CFIE が時間安定であることを数値実験的に見出した。

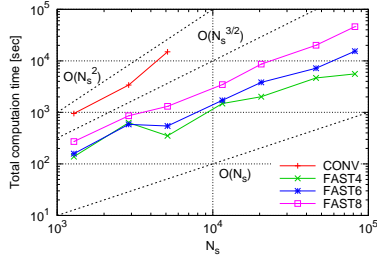
図 1 は、球形散乱体による電磁波散乱問題に関して、時間ステップ数 N_t は 1600 に固定した上で、散乱体表面を N_s 個の境界要素で分割した場合に得られた数値解について、参照解 (周波数領域の解に数値逆ラプラス変換を施して得られる半解析解) との誤差、全計算時間、ピーク使用メモリ量を計測したものである。CONV は従来アルゴリズムに従う TDBEM の結果、FAST は高速 TDBEM の結果であり、FAST に続く数字 (補間次数を表す) が大きい程、計算精度が高いが、そのトレードオフとして計算時間は増大する。いずれにしても、高速 TDBEM の計算量は理論通りに概ね $O(N_s^{1.33 \sim 1.5})$ であることがわかる。この結果をもって、本高速 TDBEM の完成とした (「5. 主な発表論文等」の上から 4 件目の論文)。

(2) 分散メモリ環境における高速 TDBEM プログラムの並列化

遺伝的アルゴリズムによる CPU 間のロードバランスを検討したところ、上述した本 TDBEM は通信負荷に対して計算負荷が多であり、後者を均等化することが (少なくとも本 PC クラスタ上では) 並列化効率を最大化することになるとの結論に至った。均等化については、IFMM における空間階層構造のレベル 2 に属するセルを全ノードで当分する単純な分割方法を採用し、当該 TDBEM のハイブリッド並列化 (= OpenMP と MPI の併用による並列化) の実装に成功した。並列化効率は概ね高々 50% 程度に留まった (図 2) が、メモリ分散が可能である点、すなわち各 PC のメモリ量の限界を緩和できる点において、本 PC クラスタのみならず、他の分散メモリ計算環境においても大規模解析の実行に有用である。

(a) 相対 l_2 誤差に基づく計算誤差(b) 散乱体表面上の点における表面電流の主要成分 J_1 の時間プロファイル (Reference は参照解)

(c) 全計算時間



(d) ピーク使用メモリ量

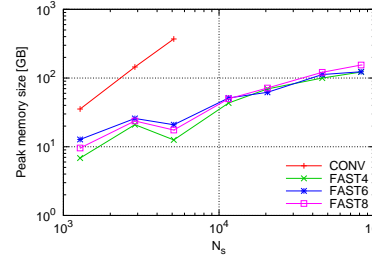
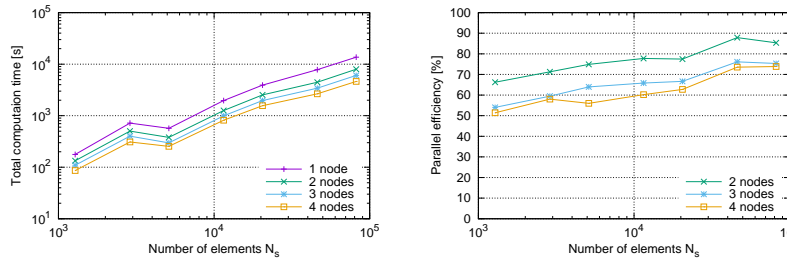
図 1: 高速 TDBEM (FAST x) と従来 TDBEM (CONV) の比較 ※「5. 主な発表論文等」の 4 件目の論文より引用

図 2: 並列高速 TDBEM コードの性能評価: (左図) 計算機ノード数が 1~4 の場合の全計算時間。(右図) 1 ノード利用時に対する利用ノード数が 2~4 の場合の並列化効率。

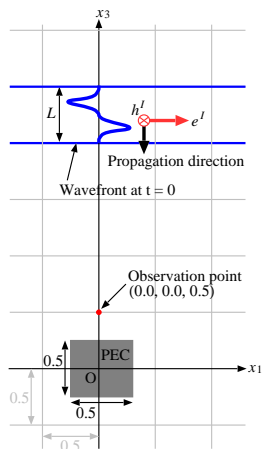
(3) 形状最適化

まず、形状微分を TDBEM によって直接扱う境界量である表面電流を用いた表現に改めることに成功した。その新しい表現は表面電流の表面発散を含むが、本研究において構築した TDBEM でも利用し、事実上の標準となっている RWG 空間基底において表面発散を取ることは容易である。第二の問題である随伴問題に対する TDBEM の構築にも成功した。随伴問題を時間反転することにより、主問題に対する TDBEM を流用できることを明らかにした。その際、主問題の入射電磁場に相当する項を精緻に書き下した。さらに、本研究は EFIE および MFIE の時間微分を用いるため、それらの項の時間微分も陽に求める必要があった。一方で、結果として主問題の電磁場の二階時間微分が必要となることがわかった。これが原因となって、前年度に開発に成功した高速 TDBEM は計算精度を十分に担保することが難しく、従来アルゴリズムに従う TDBEM によって、当該の形状最適化を実現することとした。本形状最適化プログラムの開発には、初年度に先行的に開発したスカラー波動問題の場合のプログラムを基礎とした（「5. 主な発表論文等」の上から 5 件目の論文）。図 3 のように、数値解析において良好な結果を得ることができ、その成果は国際学術雑誌に受理された（「5. 主な発表論文等」の上から 1 件目の論文）。

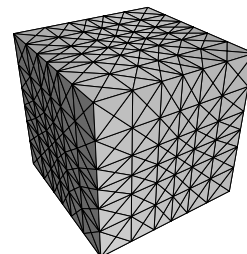
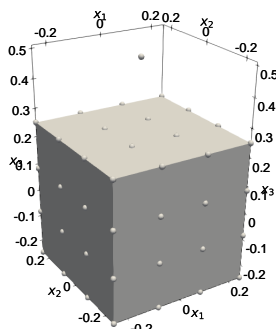
なお、本形状最適化手法の派生として、MRI 装置の勾配磁場コイルに関する形状最適化手法の構築を可能とした（「5. 主な発表論文等」の上から 2 件目の論文）。さらに、減衰を伴うスカラー波動方程式

に対する TDBEM の構築を行った（「5. 主な発表論文等」の上から 3 件目の論文）。この成果はオームの法則に従う導体への拡張に際して重要であると考えられる。

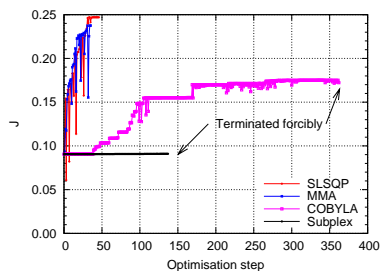
(a) 問題設定



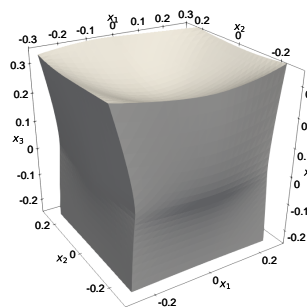
(b) 初期形状（上空の点が観測点、その他の点は設計変数である制御点） (c) 境界メッシュ



(d) 問題設定



(e) 最終形状



(f) 最終形状（背面のみ表示）

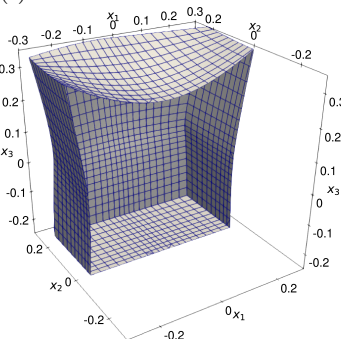


図 3: 形状最適化の例 ※「5. 主な発表論文等」の上から 1 件目の論文より引用

(4) 課題と展望

本研究課題の核心である高速 TDBEM の定式化、コード開発、並列化は成功裏に終わったと言える。これは 3 次元電磁波動散乱問題に対する新しい数値解析手法をもたらすものであり、計算科学・計算物理分野における基礎研究的な意義は深く、インパクトは高いと考えられる。一方で、本高速 TDBEM を形状最適化問題への応用には課題を残したが、TDBEM と親和性の高い形状最適化の理論を構築できた点は大きな成果である。

本研究成果を基に、完全導体のみならず、誘電体で構成された電磁場の波動散乱問題（透過問題）への拡張が次の主要な研究テーマである。

参考文献

- [1] L. Greengard et al., A fast algorithm for particle simulations, *J. Comp. Phys.*, 73, 325–348, 1987.
- [2] T. Takahashi, An interpolation-based fast-multipole accelerated boundary integral equation method for the three-dimensional wave equation, *J. Comp. Phys.*, 258, 809–832, 2014.
- [3] J. Cagnol et al., Boundary regularity for Maxwell's equations with applications to shape optimization, *J. Differential Equations*, 250, 1114–1136, 2011.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Takahashi Toru	4. 巻 -
2. 論文標題 An electromagnetic shape optimisation for perfectly electric conductors by the time-domain boundary integral equations	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Engineering with Computers	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00366-024-01990-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Toru	4. 巻 110
2. 論文標題 Designing gradient coils with the shape derivative and the closed B-spline curves	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Magnetic Resonance Imaging	6. 最初と最後の頁 112 ~ 127
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.mri.2024.03.042	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Toru	4. 巻 124
2. 論文標題 A time domain boundary element method for the 3D dissipative wave equation: Case of Neumann problems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal for Numerical Methods in Engineering	6. 最初と最後の頁 5263 ~ 5292
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/nme.7343	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toru Takahashi	4. 巻 482
2. 論文標題 A fast time-domain boundary element method for three-dimensional electromagnetic scattering problems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computational Physics	6. 最初と最後の頁 112053
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jcp.2023.112053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toru Takahashi, Naoya Miyazawa, Masaki Tanigawa	4. 巻 124
2. 論文標題 A three-dimensional shape optimization for transient acoustic scattering problems using the time-domain boundary element method	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal for Numerical Methods in Engineering	6. 最初と最後の頁 482-512
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/nme.7130	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toru Takahashi, Masaki Tanigawa, Naoya Miyazawa	4. 巻 271
2. 論文標題 An enhancement of the fast time-domain boundary element method for the three-dimensional wave equation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108229
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2021.108229	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計4件(うち招待講演 0件/うち国際学会 1件)

1. 発表者名 高橋徹
2. 発表標題 3次元電磁波動散乱問題に対する補間型高速多重極法
3. 学会等名 日本機械学会第 35 回計算力学講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高橋徹, 谷川 将規
2. 発表標題 3次元非定常音響問題に関する境界要素法を用いた形状最適化
3. 学会等名 日本機械学会第 14 回最適化シンポジウム 2022 (OPTIS2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Toru Takahashi
2. 発表標題 An acceleration of the time-domain boundary element method for electromagnetic scattering problems in 3D
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) and 8th Asian Paccific Congress on Computational Mechanics (APCOM-VIII) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高橋徹
2. 発表標題 3次元電磁波動散乱問題に対する高速時間領域境界要素法の開発に向けた基礎的検討
3. 学会等名 日本機械学会第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

BETD3D: Boundary-Element Time-Domain method in 3D https://sites.google.com/view/wave3d/betd3d
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------